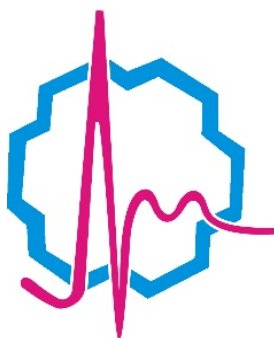


МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

ОДЕСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ імені І. І. МЕЧНИКОВА
Факультет хімії та фармацевції
ЗАПОРІЗЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ МЕДИКО-ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ФІЗИКО-ХІМІЧНИЙ ІНСТИТУТ ІМЕНІ О. В. БОГАТСЬКОГО НАН УКРАЇНИ
КООРДИНАЦІЙНА РАДА З ПРОБЛЕМИ «НАУКОВІ ОСНОВИ СТВОРЕННЯ
ЛІКАРСЬКИХ ПРЕПАРАТІВ»
ТДВ «ІНТЕРХІМ»



ІнтерХім

МІЖДИСЦИПЛІНАРНІ ПІДХОДИ ДО СТВОРЕННЯ ЛІКІВ

Збірник тез доповідей II Всеукраїнської науково-практичної
конференції з міжнародною участю

Одеса, 14–15 квітня 2026 року

ОДЕСА
ОНУ імені І. І. Мечникова
2026

STUDY OF THE ACTION OF KAEMPFEROL-LOADED BIONANOCOMPOSITES ON CORNEAL REGENERATION	69
Beşliu Alina, Coretchi Ianos, Zaltariov Mirela-Fernanda, Chiaburu Andrei, Ciubotaru Bianca-Iulia, Casian Ana, Casian Igor, Cornelia Ceban, Pavlovschi Ecaterina	
INNOVATIVE RESEARCH IN THE TREATMENT OF TYPE 2 DIABETES	72
Maria Mihalachi-Anghel, Stela Bacinschi-Gheorghita, Caracaş Anastasia, Nicolae Bacinschi	
NEW APPROACHES TO THE SYNTHESIS OF (+/-)-5-(3,4-DIHYDROXYPHENYL)- γ -VALEROLACTONE (DHPV) AS A POTENTIAL DRUG	78
Jadwiga Turło, Maciej Dawidowski, Kin Karyna, Afanasenko Olga	
BIOLOGICALLY ACTIVE NATURAL BISNAPHTHOQUINONES	80
Bacherikov V. A.	
NOVEL DIHYDROPYRAZOLE DERIVATIVES: TARGETED LEADS FOR ANTICANCER THERAPY	86
Liubomyr Havryshchuk, Roman Lesyk, Holota Serhii, Yuliia Kozak, Nataliya Finiuk	
ВИКОРИСТАННЯ ЛІЗАТУ ТРОМБОЦИТІВ ЛЮДИНИ У КУЛЬТИВУВАННІ МЕЗЕНХІМАЛЬНИХ СТОВБУРОВИХ КЛІТИН	89
Гелета Е. В., Гудзенко Т. В.	
2-AMINOBENZOIC ACID HEXAFLUOROSILICATE AS A NEW POTENTIAL CARRIES-PREVENTIVE AGENT	91
Gelmboldt V. O., Shyshkin I. O., Kobenko K. R., Nechaieva D. S., Fonari M. S., Kravtsov V. Ch.	
МЕХАНІЗМ РАНОЗАГОЮВАЛЬНОЇ ДІЇ КАЛІЙ 5-(ФУРАН-2-ІЛ)-4-ФЕНІЛ-4Н-1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ІОЛАТУ	94
Ділягін О. А., Бушуєва І. В.	
ZINC-DOPED HYDROXYAPATITES AS PROMISING MATERIALS FOR THE CREATION OF ORTHOPEDIC IMPLANTS	97
Doroshchuk V. V., Lehenchuk O. V., Syrotchuk O. A., Chumachenko V. A., Panko A. V., Dybkova S. M., Zatovsky I. V.	
INNOVATIVE STRATEGIES FOR CREATING NEW BIOLOGICALLY ACTIVE SUBSTANCES – POTENTIAL DRUGS	100
Drapak Ya. M., Zimenkovsky B. S., Kaminsky D. V., Pinyazhko O. R., Matiyuchuk Yu. E., Drapak I. V.	
ВАРІЮВАННЯ ТОПОЛОГІЇ ХІНОЛІН-ІЗОХІНОЛІН ЯК НАПРЯМОК ДИЗАЙНУ ФТОРХІНОЛОНОВИХ АНТИБІОТИКІВ	102
Євсєєва Л. В., Василюшин Р. Я., Коваль Н. В., Дорошенко А. О., Чебанов В. А., Георгіянц В. А., Коваленко С. М.	
СУЧАСНІ ПІДХОДИ ДО СИНТЕЗУ ІННОВАЦІЙНИХ ЛІКАРСЬКИХ ПРЕПАРАТІВ	105
Зверев В. М.	
ЦІЛЕСПРЯМОВАНИЙ ПОШУК ІНГІБІТОРІВ ФОСФОЛІПАЗИ А2 СЕРЕД 1,8-ДИЗАМЩЕНИХ ТЕОБРОМІНУ	107
Іванченко Д. Г.	
СИНТЕЗ ТА ХІМІЧНА МОДИФІКАЦІЯ S-ПОХІДНИХ 1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ІОЛІВ, ФУНКЦІОНАЛІЗОВАНИХ ТІОПРИМІДИНОВИМ ФРАГМЕНТОМ, ЯК ПЛАТФОРМИ ДЛЯ СТВОРЕННЯ ІННОВАЦІЙНИХ ЛІКАРСЬКИХ КАНДИДАТІВ	110
Карпенко Ю. В.	

СИНТЕЗ ТА ХІМІЧНА МОДИФІКАЦІЯ S-ПОХІДНИХ 1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ТІОЛІВ, ФУНКЦІОНАЛІЗОВАНИХ ТІОПІРИМІДИНОВИМ ФРАГМЕНТОМ, ЯК ПЛАТФОРМИ ДЛЯ СТВОРЕННЯ ІННОВАЦІЙНИХ ЛІКАРСЬКИХ КАНДИДАТІВ

Карпенко Ю. В.

Запорізький державний медико-фармацевтичний університет, Запоріжжя,
Україна. E-mail: karpenko.y.v@gmail.com

Пошук інноваційних лікарських кандидатів у межах сучасної медичної хімії дедалі частіше базується на концепції «гібридних» молекул, що поєднують у межах однієї структури декілька фармакофорних фрагментів для досягнення мультитаргетного профілю дії та оптимізації ADME-параметрів. Перспективним напрямом є використання 1,2,4-триазольного ядра як синтетично доступної та фармакологічно значущої платформи з подальшою S-функціоналізацією, зокрема введенням тіопіримідинового фрагмента та модифікацією «S-ланцюга» для тонкого налаштування ліпофільності, електронної густини та реакційної здатності. Метою роботи було розробити раціональні підходи до синтезу та спрямованої структурної модифікації S-похідних 4-метил-5-((піримідин-2-ілтіо)метил)-4Н-1,2,4-триазол-3-тіолу з отриманням бібліотеки сполук та встановленням ключових закономірностей «умови реакції – вихід – селективність».

Синтетична стратегія будувалася навколо двох взаємодоповнювальних маршрутів: одержання вихідного 1,2,4-триазол-3-тіолу та його тіол/тіонної системи у придатному для S-алкілювання вигляді; подальша S-функціоналізація з формуванням серії тіоефірів/тіоацетатів/солей і похідних з різною довжиною та природою алкільного замісника.

Контроль перебігу реакцій та ідентифікація цільових продуктів здійснювали комплексом фізико-хімічних методів (ТШХ/ВЕРХ за необхідності; ЯМР $^1\text{H}/^{13}\text{C}$ для встановлення структури та співвідношення таутомерних форм; LC-MS для підтвердження молекулярної маси та характерних іонів). Сукупність спектральних ознак дозволяла надійно диференціювати S-похідні від можливих ізомерів, а також підтверджувати чистоту синтезованих сполук для подальших етапів біологічного скринінгу.

У межах біологічного етапу роботи синтезовані S-похідні 1,2,4-триазолу, функціоналізовані тіопіримідиновим фрагментом, піддавалися первинному фармакологічному скринінгу з фокусом на аналгетичну, протизапальну та антиоксидантну активність як найбільш релевантні для обраної хемотипової платформи: оцінювали здатність сполук знижувати прояви запалення та

больової реакції, а також впливати на маркери оксидативного стресу (антирадикальна/цитопротекторна дія). Паралельно здійснювали ранню оцінку профілю безпеки за токсикологічними індикаторами на альтернативних модельних об'єктах (зокрема *Danio rerio*), що дозволяло відсівати структури з небажаними ефектами та виділяти сполуки з найкращим співвідношенням «ефективність/безпека». За сукупністю отриманих даних сформовано пріоритетну групу кандидатів і визначено сполуку-лідера з найбільш збалансованим фармакологічним профілем для подальшої доклінічної розробки.

Висновки

Розроблено та оптимізовано синтетичні підходи до отримання бібліотеки S-похідних 1,2,4-триазол-3-тіолів, функціоналізованих тіопіримідиновим фрагментом, із керованою структурною варіабельністю S-ланцюга.

Встановлено, що м'які основні умови в полярних апротонних середовищах забезпечують переважну S-селективність алкілування та відтворювані виходи цільових продуктів.

Запропоновано напрямки цілеспрямованої модифікації (тіоефіри/тіоестери/солі) як інструменти для оптимізації розчинності та ліпофільності, що є важливим для подальшого формування «лідер-кандидат» та розробки інноваційних лікарських препаратів.

Ця робота була підтримана грантом Президента України на підтримку наукових досліджень та розробок молодих вчених (грант № 2025.05/0022), проект «Гібридні сполуки 1,2,4-триазолу та оротової кислоти з радіопротекторними, ранозагоювальними та регенеративними властивостями для потреб цивільного населення та ЗСУ».

Література:

1. Karpenko, Y., Tüzün, G., Parchenko, V., Aydın Köse, F., Ogloblina, M., Yıldırım, Ş., Bushuieva, I., Kocyigit, U. M., Khilkovets, A., Tüzün, B., & Parchenko, M. (2025). *Cytotoxic potential of novel triazole-based hybrids: Design, synthesis, in silico evaluation, and in vitro assessment against cancer cell lines*. *Bioorganic Chemistry*, 163, 108749. <https://doi.org/10.1016/j.bioorg.2025.108749>
2. Karpenko, Y. V., Panasenko, O. I., Zazharsky, V. V., Parchenko, V. V., Pidlisny, O. V., Yaroshenko, I. V., Bilan, M. V., Davydenko, P. O., Kulishenko, O. M., & Zazharska, N. M. (2025). *Synthesis, chemical properties and search for molecular descriptors of the fungicidal activity of new hybrids of 1,2,4-triazole(1,3,4-oxadiazole) bearing a pyrimidine fragment*. *Issues of Chemistry and Chemical Technology*, (4), 58–69. <https://doi.org/10.32434/0321-4095-2025-161-4-58-69>